

Исследование из первых принципов структурных свойств сплавов Гейслера на основе $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$ ($x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$)

Саносян Артур Азатович
Соколовский Владимир Владимирович
Челябинский государственный университет.
Соколовский Владимир Владимирович
arthursanosyan@mail.ru

Функциональные свойства сплавов Гейслера на основе Co являются перспективными и в частности, при создании постоянных магнитов [1]. Данные сплавы состоящие из относительно дешевых элементов могут стать заменой современных постоянных магнитов на редкоземельных элементах, таких как (Dy, Nd). В результате это позволит значительно удешевить их себестоимость.

В данной работе рассматриваются сплавы Гейслера $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$ ($x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$). Исследования из первых принципов были выполнены на программном пакете «VASP» [2,3]. Расчеты проводились для 16 атомной суперячейки в приближении GGA-PBE, для различных типов кристаллических структур в кубической и тетрагональной фазе. В результате были рассчитаны равновесные состояния для каждой структуры с различным соотношением Ni и Sn. Также рассчитана зависимость энергии кристалла от степени тетрагонального искажения c/a (рис.1.). В качестве кристаллической структуры аустенитной и мартенситной рассматривались пять типов решеток с различным атомным упорядочением (рис.2.).

В ходе расчетов были определены устойчивые кристаллические структуры для каждой из представленных композиций. Рассчитаны равновесные состояния сплавов в зависимости от параметра решетки. Из (рис.1.) видно, что в аустенитной фазе преобладает структура 1 с атомным упорядочением типа A), а в мартенсите наиболее выгодной является структура 2 с типом кристаллической структуры Б).

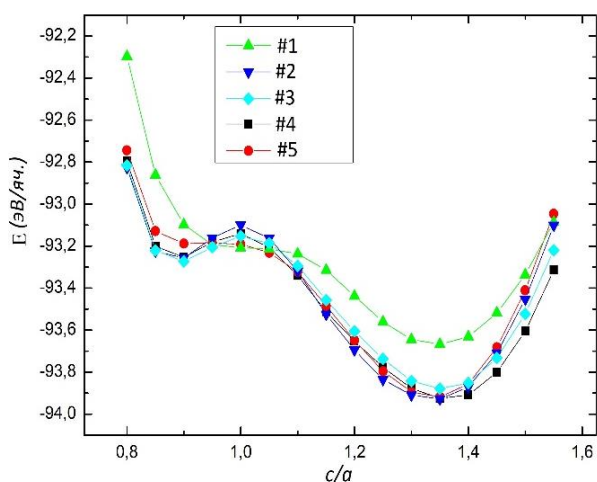


рис.1. Зависимость энергии кристалла $\text{Co}_2\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}_{1-x}$ от степени тетрагонального искажения c/a .

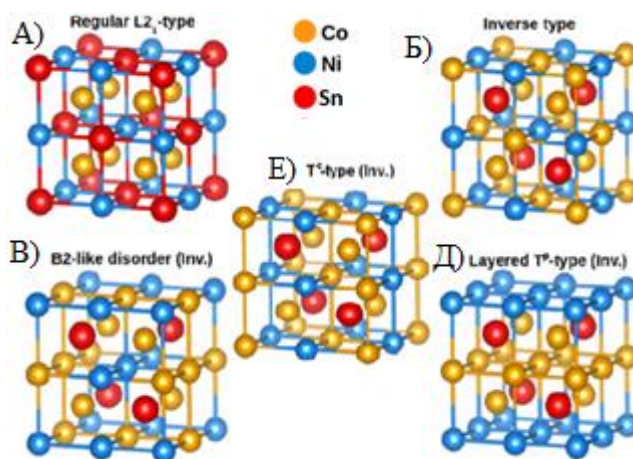


рис.2. Типы кристаллических структур. при $x=0$ от степени тетрагонального искажения c/a .

Список публикаций:

- [1] A. Planes et al., *J.Phys.: Condens. Matter* 21, 233201 (2009).
- [2] G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* 54, 11169 (1996).
- [3] G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* 59, 1758 (1999).